連成調和振動子系モデルの運動性タンパク質への適用(力学系と複雑性,基研長期研究会「複雑系4」)

浅井, 博

連成調和振動子系モデルの運動性タンパク質への適用

早大理工　浅井　博

１．はじめに

運動性タンパク質、基質結合タンパク質、酵素などの機能発現は、タンパク質を構成する原子分子の振動の時間に比べて、極めて遅い。例えば、最も早い反応のカタラーゼですら、１個の過酸化水素を分解するのに約１マイクロ秒かかる。筋肉タンパク質ミオシンの場合には、サブ秒もかかる。このような機能性タンパク質には、結合または反応のエネルギーを長時間蓄え、序々に放出または利用するメカニズムがあるはずである。

また、生物におけるエネルギーの遣り取りはＡＴＰの燐酸分解を通じて行われるが、そのエネルギーは高々 7.3 K Cal/mole である。これは、たった８個の分子の三次元的運動エネルギーに相当する。本論文では、タンパク質の長時間エネルギー蓄積のメカニズムが連成調和振動子モデルで巧く説明できることを指摘する。実は、均一結晶に一個の軽いアイソトープが混入しているときには、そこに長時間後で localized mode （他から与えられた振動エネルギーの一部がそこに貯まること）が存在すること示されている[1]。 一次元連成調和振動子の場合の長時間後の 三角関数解 (localized mode) [2] および任意の時間発展解[3]も得られている。本論文は小数の不純物を含む一次元連成調和振動子モデルのタンパク質への適用および時間発展方程式の解の理論構成の一般化に関する。軽い振動子の候補者の一つとして、タンパク質の活性部位の近くの水分子も考えられる。

２．理論構成

時間発展の解を得るには、一次元の無限に続く連成調和振動子モデルが易しい。無限均一連成調和振動子の中に小数の不純物振動子がある系を考える。そこには、外力が加えられる振動子や粘性抵抗のある振動子もあってよい。粘性抵抗のある場合には、ランジバン方程式を構成する。均一連成調和振動子に対しては、次の式が成立する。

$$d^2/dt^2\, X_n(t) - k/m\cdot \{ X_{n-1}(t) - 2\cdot X_n(t) + X_{n+1}(t)\} = 0 \qquad (1)$$

$$n = -\infty ,,, -1,\ 0,\ 1,,,,,,, \infty$$

$$n \neq j$$

小数の不純物振動子には、 $n = j$ として、上の式の右辺に $= 0$ の代りに次の三つの式が加わる。その一つは不純物振動子として、次の項が加わる。

$$(k_j/m_j - 1)\cdot \{ X_{j-1}(t) - 2\cdot X_j(t) + X_{j+1}(t)\}, \qquad (2)$$

$$j = f,\ f+1,\ .....$$

また摩擦がある場合には、ランジバン方程式の項として、次の式が加わる。

$$\eta_j/m_j\cdot\ d/dt\ \{\ X_{j-1}(t)\ -\ 2\cdot X_j(t)\ +\ X_{j+1}(t)\ \}\ +\ 1/m_j\cdot F_j(t)$$

$$j = k,\ k+1,\ ....$$

ここで、η_jは摩擦係数、F_jは摩擦を起こす外力である。さらに、エネルギーを外から加える項、または／およびエネルギーを与える項として

$1/m_a\cdot F_a(t)$　または／および $1/m_b\cdot F_b(t)$ の項が (1) 式の右辺に加わる。

一般的な解法としては上の式の両辺に S^n を掛け $E(S,t)\ \equiv\ \ S^n\ \cdot X_n(t)$ という母関数をつくり、 $E(S,t)$ のラプラス変換の式をまづ解くことである。ただし、上式の右辺の項は全て$E(S,t)$の微分方程式の非斉次項である。ラプラス変換の逆変換が難しいが、ベッセル関数の定義に立ち返って解けることに気付いた。

3. 簡単な例について解

不純物としての f 番目の振動子の質量は他と同じであるが、その両側のスプリング定数だけが他と異なり、（１＋ε）倍である例について述べる。f-1 番目と f 番目と f+1 番目の振動子以外の連成振動子の運動方程式は (1) と同じであるが、f-1 番目の振動子の運動方程式は

$$d^2/dt^2\ X_{f-1}\ -\ k/m\cdot\ \{\ X_{f-2}\ -\ 2\cdot X_{f-1}\ +\ X_f\}\ \ =\ -\ k\varepsilon/m\cdot\ \{X_{f-1}\ -\ X_f\}\ 、$$

f 番目の振動子の運動方程式は

$$d^2/dt^2\ X_f\ -\ k/m\cdot\ \{\ X_{f-1}\ -\ 2\cdot X_f\ +\ \ X_{f+1}\}\ \ =\ \ k\varepsilon/m\cdot\ \{X_{f-1}\ -\ X_f\}$$
$$-\ k\varepsilon/m\cdot\ \{X_f\ -\ X_{f+1}\}$$

f+1 番目の振動子の運動方程式は

$$d^2/dt^2\ X_{f+1}\ -\ k/m\cdot\ \{\ X_f\ -\ 2\cdot X_{f+1}\ +\ \ X_{f+2}\}\ \ =\ \ k\varepsilon/m\cdot\ \{X_f\ -\ X_{f+1}\}\ 、\qquad (2)$$

である。上の二式の両辺に S^n を掛け $E(S,t)\ \equiv\ \ S^n\ \cdot X_n(t)$ という母関数をつくると、

$$d^2/dt^2\ E\ -\ 1/2\cdot\ \{S^{1/2}\ -\ S^{\ -1/2}\}^{\ 2}\ E$$
$$=\ -\varepsilon/4\cdot\ \{\ S^{f-1}\cdot\ (X_{f-1}\ -\ X_f)\ -\ S^f\cdot\ (X_{f-1}\ -\ 2\cdot X_f\ +\ \ X_{f+1})\ -\ S^{f+1}\cdot\ (X_f\ -\ X_{f+1})\ \}\ 、\qquad (5)$$

となる。ただし、$k/m\ =\ \alpha^2$ として、時間 t の代りに $2\alpha t\ \equiv\ z$ を X_n や E の独立変数としてある。右辺がゼロである場合の斉次方程式の解は $E\equiv\sum_{-\infty}^{\infty} S^n\ \cdot J_n(z)$ と解かれる。すなわち $X_n(t)\ =\ J_{2n}(z)$である。 ただし、簡単のため、初期条件($z\ =\ 0$)として、ゼロ番目の振動子の変位が１で初速度はゼロとしてあり、他の振動子の変位と初速度は全てゼロとしてある。$J_n(z)$ と$X_n(z)$のラプラス変換を夫々G_n (u) と g_n (u) とすると、上の(5)式は

$$G_n\ -\ g_n\ =\ -\varepsilon/4u\ \cdot\ \{\ (g_{n-f+1}\ -\ g_{n-f})\ \cdot\ (G_{f-1}\ -\ G_f)$$
$$+\ (g_{n-f}\ -\ g_{n-f-1})\ \cdot\ (G_f\ -\ G_{f+1})\ \}$$

$n\ =\ f\ -1$ 、$n\ =\ f$ 、$n\ =\ f+1$ の場合の三式の連立方程式を解いて、

$G_f - g_f = -1/2\ (r-u)^{2<f-1>} \cdot (1 - <r-u>)^2\ (G_0 - g_0)$ (5)

ただし、$f = 0$ のとき

$G_0 - g_0 = -2\varepsilon/r\ (r-u)^2\ (1 - <r-u>^2)\ /\ \{1 + (1+3\varepsilon)(r-u)^2 - \varepsilon\ (r-u)^4\}$ 、 (6)

ただし、$r \equiv (u-1)^{1/2}$で、 $(r-u)^{2n}/r$のラプラス逆変換は$J_{2n}(z)$である。したがって、(6)式を$(r-u)^2$の二重級数として展開し、ラプラス逆変換を施すことによって、解の$X_0(z)$、$X_f(z)_{\gamma}$ $X_n(z)$がえられる。形式的な解はそれで良い。しかし、εが正のとき展開式の係数は発散する。これは時間無限大でも残る三角関数の解の項が存在することを示唆する。

$J_j(z)$ は $1/<2\pi i> \cdot \oint u^{-1} \exp\{z/2 \cdot (u - u^{-1})\}\ u^{-|j|}\ du$ と定義される。ここで積分は中心ゼロの周りを逆時計的にする。G_0およびG_f中のベッセル関数を上の式で書き直し、級数展開式を元の式に直すと、

$x_0(z) - J_0(z) = -\ \varepsilon/<\pi i> \cdot \oint u^{-1} \exp\{z/2 \cdot (u - u^{-1})\}$

$\cdot\ \{ (u^{-2} - u^{-4})\}\ /\ \{1 + (1+3\varepsilon)\ u^{-2} - \varepsilon u^{-4}\}\ \ du$

$x_f(z) - J_{2f}(z) = \varepsilon/<2\pi i> \cdot \oint u^{-1} \exp\{z/2 \cdot (u - u^{-1})\}$

$\cdot\ \{ u^{-2<f-1>-2}\ (1 - u^{-1})^2 (1 - u^{-2})^2\}\ /\ \{1 + (1+3\varepsilon)\ u^{-2} - \varepsilon u^{-4}\}\ \ du$

上二式の夫々の分母はu^{-1}の二つの虚根 $\pm\ i\lambda \equiv \pm\ i\ (\ <1+3\varepsilon> + <1+10\varepsilon + 9\varepsilon^2>^{1/2}\ )^{1/2}$と二つの実根$\pm(-\ <1+3\varepsilon> + <1+10\varepsilon + 9\varepsilon^2>^{1/2})^{1/2}$を持つ。$\lambda$が１より大のときのみ、意味のある三角関数の解の項が存在することが上式の複素積分によって示される。

同じ様にして$x_n(z)$を解くことができる。

ちなみに、柏村 [3] はイテレーション法によって、一個の不純物アイソトープを含む一次元連成振動子の時間発展解を得たが、(5),(6)に相当する式は、夫々

$G_f - g_f = 2\varepsilon/r\ (r-u)^{2<f+1>} \cdot /\ \{1 + (1 + 2\varepsilon)(r-u)^2\}$ (5)

$G_0 - g_0 = 2\varepsilon/r\ (r-u)^2 /\ \{1 + (1 + 2\varepsilon)(r-u)^2\}$ 、

となり、 $(r-u)^2$の一重級数で展開される。

４．結論

以上述べてきたように、小数の不純物を含む一次元連成振動子をタンパク質のモデルと身見立てた場合、その任意の振動子の変位$x_n(z)$の解は、$x_n(z)$のラプラス変換の連立方程式を解くこと、その解のラプラス逆変換によって、求められる。不純物の種類および数が多いほど連立方程式を解くことおよびラプラス逆変換はより複雑になるが、 localized mode （他から与えられた振動エネルギーの一部がそこに貯まること）が存在するかどうかは、ラプラス逆変換の被積分関数の特異点の複素数値によって判定される。 タンパク質に localized mode が実際に存在するかどうかは将来の実験的検証に待たなければならない。

謝辞

本論文において三角関数に戻すための複素積分の方法に関して助言をいただいた当研究室の柴原輝久氏らに感謝の意を表する。

参考文献

[1] Montroll, E., and R. B. Potts. 1955. Effect of defects on lattice vibrations. Phys. Rev. 100: 525-543.

[2] Teramoto, E., and S. Takeno. 1960. Time dependent problems of the localized lattice vibration. Prog. Theor. Phys. (Kyoto) 24: 1349-1368.

[3] Kashiwamura, S. 1962. Statistical dynamical behaviors of a one-dimentional lattice with an isotopic impurity. Prog. Theor. Phys. (Kyoto) 27: 571-588.